

# 同步辐射散射图像中心定位算法研究

刘中华 边风刚 李勇平 李秀宏 田 丰

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

**摘要** 介绍了一种基于相空间重构和主分量分析的样品在同步辐射 SAXS\WAXS 各向同性图像中散射环的中心定位算法。该算法在水平和垂直方向上分别扫描散射图像,并提取图像部分行和列的主分量以提高散射环中心定位的准确性,再根据圆的垂线定理确定圆心。通过实验计算的结果和 fit2d 软件的比较,验证了该算法的有效性。

**关键词** 相空间重构,主分量分析,中心定位,小角散射

**中图分类号** TP274, O4-39

X 射线照射到样品上,会在小角范围内产生散射花样,称为小角 X 射线散射(SAXS)<sup>[1]</sup>。在 SAXS 数据处理中,一个最基本的需求是确定散射矢量  $q$  与散射强度  $I(q)$  的准确关系,为此必须知晓实验中直通光的空间位置。而 SAXS 实验中直通光不能直接入射到 X 射线探测器上,须通过间接方法获得直通光在探测器面上的位置,即“中心”位置。常见的方法是利用样品自身的散射强度特性,认为散射强度以中心为圆心,可较好地拟合出中心位置。因此,准确确定实验获取的小角/广角 X 射线散射(SAXS\WAXS)图像的中心,对于判断样品的结构有重要意义。

目前,常用 fit2d 软件处理 SAXS\WAXS 图像,选取散射图像的圆心时,要选取同一个环上散射强度较接近的三个点来定位圆心。其缺点是仅靠肉眼识别,误差较大。为提高散射图像中心定位的准确性,本文提出基于相空间重构以及主分量分析的 SAXS\WAXS 图像中心定位算法。对该方法进行了实验验证,结果良好。

该算法的基本思想如下:首先,在 SAXS\WAXS 图像上水平和垂直方向分别选取多条直线,这些直线所对应的散射强度值在理论上是中心对称的曲线。然后对这些散射强度曲线求导,找出斜率对称的点对,如散射峰所对应的点对,两对称点所确定的中心点,就是图像中心的横坐标(由水平方向上的直线确定)或纵坐标(由垂直方向上的直线确定)。然而,实验获得的散射图像不可避免地存在噪声干扰,对散射强度曲线直接求导会有多个交替出现的正负导数,影响中心定位的准确性。故须在求导前对散射强度曲线进行平滑处理,即提取信号的趋势项。

用基于相空间重构和主分量分析的算法对原始数据序列进行分析并建模,可更好地获取光滑的散射强度曲线的主分量,进一步提高 SAXS\WAXS 图像中心定位的准确性。

## 1 相空间重构理论

相空间重构最初由 Packard 等提出, Takens 给予了数学证明<sup>[2,3]</sup>。相空间重构理论认为一个系统的状态可由多个分量描述,由于系统任一分量的演化是由与之相互作用着的其它分量所决定的,因此这些相关分量的信息就隐含在任一分量的发展过程中,这样就可以从某一分量的时间序列数据中提取和恢复出动力系统原来的规律。

相空间重构的依据主要是 Takens 的延时嵌入定理,其证明:可以找到一个合适的嵌入维数  $d$ , 观察到的时间序  $\{x(n)\}=\{x(1),x(2),\dots,x(n)\}$  以如下向量形成  $d$  维空间

$$X_i=[x(i),x(i-\tau),\dots,x(i-(d-1)\tau)]^T,$$

其中,  $i\in[(d-1)\tau+1,n]$ 。如果延迟坐标的维数  $d\geq 2m+1$ , 其中  $m$  是吸引子的维数,  $\tau$  是坐标延迟时间间隔,则动力系统的几何结构就可以完全打开,亦即在重构的相空间中的轨线上原动力系统保持微分同胚。

目前,多数方法是把确定  $\tau$  和  $d$  分两步考虑,因此难以保证得到的嵌入相空间能最佳再现原动态系统的行为。文献[4,5]给出了同时确定最佳延迟时间  $\tau$  与嵌入维数  $d$  的方法,并证明该方法具有很高的优越性,本文引用了文献[5]的方法。

## 2 对散射强度曲线重构相空间

设散射强度曲线为长度  $n$  的零均值数据序列  $\{x(1), x(2), \dots, x(n)\}$ —若实际序列为非零均值, 则先去直流化, 序列有  $n$  个元素值。

设延迟时间为  $\tau$ , 嵌入相空间维数为  $d$ , 则嵌入

$$X = \begin{bmatrix} X_{(d-1)\tau+1}^T \\ \vdots \\ X_{n-1}^T \\ X_n^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x((d-1)\tau+1) & x((d-2)\tau+1) & \cdots & x(1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x(n-1) & x(n-1-\tau) & \cdots & x(n-1-(d-1)\tau) \\ x(n) & x(n-\tau) & \cdots & x(n-(d-1)\tau) \end{bmatrix} \quad (2)$$

矩阵  $X$  的每行代表嵌入相空间的一个向量, 即嵌入相空间的一个点,  $M=n-(d-1)\tau$  是  $d$  维重构相空间吸引子上点的数目。

矩阵  $X$  每一列是各个延时坐标在不同时刻的观测值, 所有延时坐标变量共计  $d$  个, 由这  $d$  个变量构成的坐标系一般不具有正交性, 主分量分析<sup>[6,7]</sup>就是由此出发对矩阵  $X$  做适当变换, 使变换结果在新的坐标系满足正交性。表述如下<sup>[6]</sup>:

一般情况下  $d < M$ , 则矩阵  $X$  可分解为

$$X = VSU^T \quad (3)$$

其中,  $S$  是  $d \times d$  阶对角矩阵, 元素为

$$S_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{\lambda_i}, i, j = 1, 2, \dots, d \quad (4)$$

$V$  是  $M \times d$  阶矩阵, 满足列向量正交

$$(V^T V)_{ij} = \delta_{ij} \quad (5)$$

$U$  是  $d \times d$  阶正交矩阵, 满足

$$(U^T U)_{ij} = (UU^T)_{ij} = \delta_{ij} \quad (6)$$

矩阵  $X$  的协方差矩阵  $A$  为

$$A = X^T X \quad (7)$$

把式(3)代入式(7)得

$$A = X^T X = USV^T VSU^T = US^2 U^T \quad (8)$$

从而有

$$U^T A U = S^2 = A = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d\} \quad (9)$$

假设  $d \times d$  阶矩阵  $A$  的特征值  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d$  互不相同, 则对应的特征向量  $u_1, u_2, \dots, u_d$  是唯一的, 可以写成:

$$A u_i = \lambda_i u_i, i = 1, 2, \dots, d \quad (10)$$

相空间的向量为:

$$X_i = \{x(i), x(i-\tau), \dots, x([i-(d-1)\tau])\}^T, i \in [(d-1)\tau+1, n] \quad (1)$$

采用延时方法由序列  $\{x(1), x(2), \dots, x(n)\}$  形成  $(n-(d-1)\tau \times d)$  阶轨道矩阵, 令  $M=n-(d-1)\tau$ , 则矩阵  $X$  可表示成  $M \times d$  阶矩阵:

把  $d$  个特征值按照从大到小的排列, 即

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_i \dots > \lambda_d \quad (11)$$

按式(11)排列顺序的特征值所对应的特征向量构成一个  $d \times d$  阶矩阵:

$$U = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_d] \quad (12)$$

结合上述公式可得, 数据矩阵  $X$  的趋势项可表示为:

$$\hat{X} = XU_p U_p^{-1} \quad (13)$$

令  $U_p = [u_1 \ \dots \ u_r \ \dots \ \bar{0}]$ , 表示前  $r$  个特征值所对应的特征向量, 矩阵  $\hat{X}$  的第一列就是观测数据序列的主分量, 即趋势项。其中  $r$  的个数越大, 提取的趋势项越光滑。通过多次实验发现, 一般  $r$  的值取 4 或 5 即可。

## 3 实验

实验采用的图像数据, 是在上海光源小角散射实验线站采集到  $\text{CeO}_2$  样品的 WAXS 图像, 探测器距离为 12 cm, 波长  $\lambda=1.24 \text{ \AA}$ 。像素点数为  $2048 \times 2048$  的  $\text{CeO}_2$  散射图像中心定位设计思想如图 1 所示。

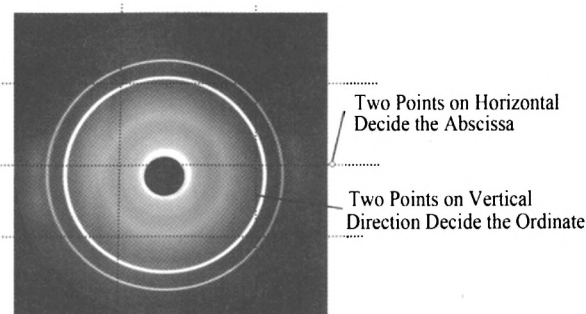


图 1 散射图像上取直线  
Fig.1 Extracting line on scattering image.

水平方向圆上对称的两点确定中心的纵坐标，垂直方向上对称的两点确定横坐标。为了提高精确度，水平及垂直方向上取多条直线求得中心的平均值。二维图像上截取的每条直线在一维空间上是一

条长度为 2048 的散射强度曲线。本文提出的算法以该图像上第 1024 行所对应的散射强度曲线为例计算，该曲线如图 2 所示。

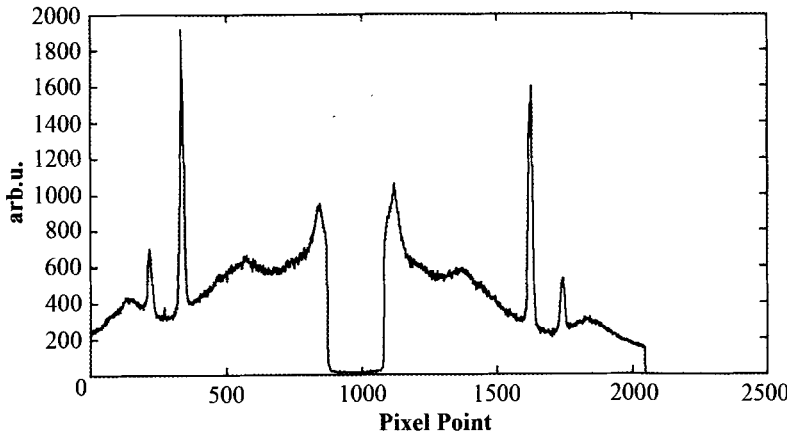


图 2 CeO<sub>2</sub> 散射图像的第 1024 行所对应的散射强度曲线  
Fig.2 Scattering intensity curve of the 1024 row in scattering image of CeO<sub>2</sub>.

对图 1 所示的散射强度曲线利用文献[5]中提出的最佳嵌入相空间维数  $d$  与延迟时间(延迟步长)  $\tau$  的搜索算法计算出的最佳嵌入维数和延迟步长分别为 13 和 7。设定嵌入维数和延迟步长分别为 13 和 7，采用本文第 2 部分的算法，计算得出的 CeO<sub>2</sub> 散射图像第 1024 行散射强度曲线的趋势项及次要分量和噪声序列如图 3 所示。由图 3，用该方法提取的趋势项较光滑且保留原始数据的主要特征。对该散射强度曲线的趋势项求导，由于散射强度曲线在理论上是关于中心点对称的，该曲线的导数曲线关于

中心点在数值上具有对称性，但是正负相反。实际计算中，一对正负相反的导数对并非在数值上绝对相同，因此取导数正负跳变的点来计算曲线中心点就较为准确。由图 4，散射峰 1 位于第 226 和第 1748 个像素点处，散射峰 2 位于第 336 和 1639 个像素点处，两个点对确定的散射图像的圆心的纵坐标为 987.25。为提高准确性，又选取第 800 行以及第 1600 行散射强度曲线来定位图像圆心的纵坐标，求出平均的纵坐标为第 987.5 个像素点处。

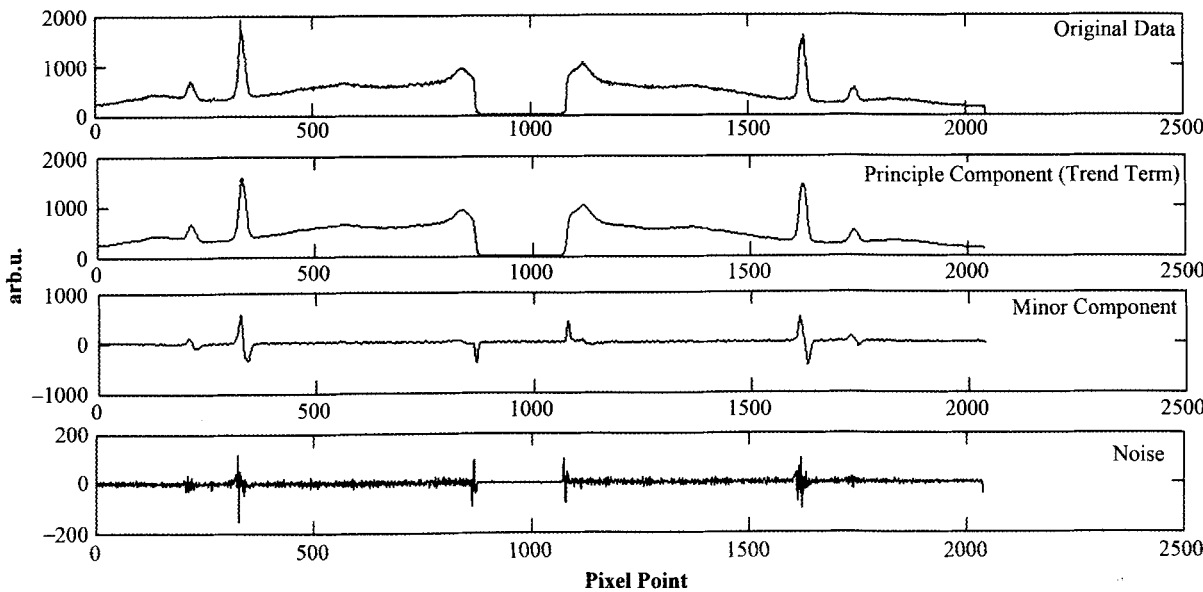


图 3 散射强度曲线原始数据及其各分量  
Fig.3 The original data and their PCs.

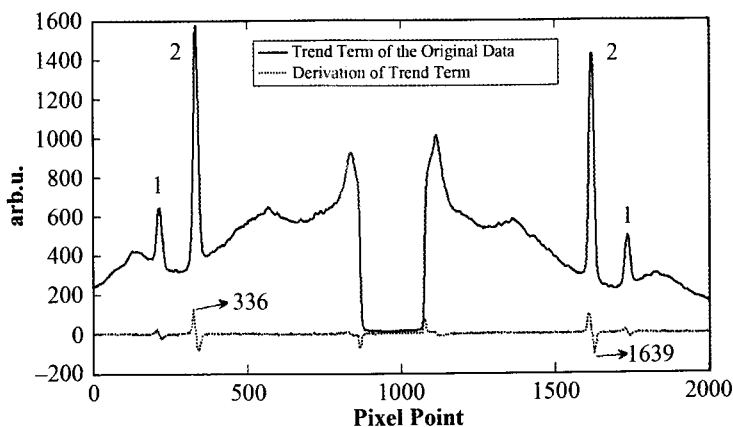


图4 散射强度曲线趋势项及其导数  
Fig.4 Trend curve of original data and their derivative.

同理,运用所提方法得出的圆心横坐标为 1095 个像素点处。

事业 fit2d, 用肉眼观测三个相同散射强度点确定的圆心, 以及用本文提出的算法确定的圆心, 来分别计算  $\text{CeO}_2$  的散射强度曲线, 结果如图 5 所示。

用 fit2d 得出的  $\text{CeO}_2$  散射峰对应的角度分别是  $23.3535^\circ$  和  $27.0023^\circ$ , 算法求出的  $\text{CeO}_2$  散射峰对应的角度分别是  $23.23^\circ$  和  $26.901^\circ$ 。理论上,  $\text{CeO}_2$  散射峰对应的角度分别是  $22.866^\circ$  和  $26.466^\circ$ 。可见, 本文提出的算法可有效定位散射图像圆环的中心, 并具有较好精度。

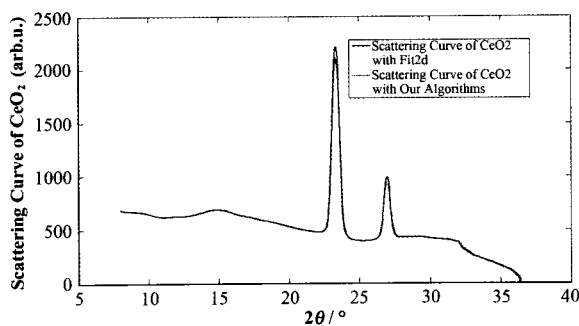


图5  $\text{CeO}_2$  散射强度曲线  
Fig.5 Scattering intensity curve of  $\text{CeO}_2$ .

#### 4 结语

用相空间和主分量分析理论对图像的行或列数据去噪, 以及去除次分量的干扰, 对提取的主分量信号应用圆的垂线定理, 对各向同性样品的 SAXS\WAXS 的图像能有效定位散射环的中心。本文算法通过已知的“标准”样品  $\text{CeO}_2$  的 WAXS 散射图像加以验证, 并和目前被广泛使用的处理 SAXS\WAXS 图像的常用软件 fit2d 加以对比, 两种

方法确定的中心基本一致, 证明所提出的方法具有很高的准确性。

理论上, 用本文提出的算法定位散射峰比较弱或者散射峰比较宽的试样的散射图像中心, 会比 fit2d 更精确, 但目前没有这样的“标准”试样, 无法加以验证。本文算法对各向异性的样品的散射图像的中心定位还存在一些问题, 不能处理所有的各向异性的散射图像, 需要进一步的完善, 以获得更广泛的应用。

#### 参考文献

- 1 王维, 陈兴, 蔡泉, 等. 小角 X 射线散射(SAXS)数据分析程序 SAXS1.0[J]. 核技术, 2007, 30(7): 571-575  
WANG Wei, CHEN Xing, CAI Quan, et al. SAXS1.0—a program for small-angle X-ray scattering data analysis[J]. Nucl Tech, 2007, 30(7): 571-575
- 2 王东生, 曹磊. 混沌、分形及其应用[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1992  
WANG Dongsheng, Cao Lei. Chaos, fractal and their application[M]. Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 1992
- 3 吕金虎, 陆君安, 陈士华. 混沌时间序列分析及其应用[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2002  
LV Jinhu, LU Jun'an, CHEN Shihua. Chaotic time series analysis and application[M]. Wuhan: Press of Wuhan University, 2002
- 4 Buzug Th, Pfister G. Optimal delay time and embedding dimension for delay time coordinates by analysis of the global static and local dynamical behavior of strange attractors[J]. Physical Review A, 1992, 45(10): 7073-7084

- 5 谢宏, 刘中华. 基于嵌入相空间和盲信号分离的短时交通流预测. CIS 国际会议, 2008.11  
XIE Hong, LIU Zhonghua. Short-term traffic flow prediction and on embedding phase-space and blind signal separation. Cybernetics and Intelligent Systems, 2008 IEEE conference on. 2008.11
- 6 史习智. 信号处理与软计算[M]. 北京: 高等教育出版社, 2003: 318–320
- SHI Xizhi. Signal processing and soften-computing[M]. Beijing: Higher Education Press, 2003: 318–320
- 7 张发启. 盲信号处理及应用[M]. 西安: 西安电子科技大学, 2006: 2–20  
ZHANG Faqi. Operation and Application of Blind Signal [M]. Xi'an: Press of Xi'an Electronic Science & Technology University, 2006: 2–20

## Algorithms for locating a center-point of the synchrotron radiation images

LIU Zhonghua BIAN Fenggang LI Yongping LI Xiuhong TIAN Feng

( Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China )

**Abstract** In this paper, an algorithm based on phase-space reconstruction and principal component analysis is used to locate the center-point of the SAXS\WAXS isotropic patterns. In the algorithm, the scattering patterns are scanned in the horizontal and vertical directions, and certain rows and columns of the patterns are extracted to improve the accuracy of the center positioning. The center of scattering patterns is decided with the perpendicular theorem of the circle. Compared with fit2d, experiment results shows the method is of good effectiveness.

**Key words** Phase-space reconstruction, Principal component analysis, Center positioning of a circle, SAXS

**CLC** TP274, O4-39